

The equipment of the Ural Center for Shared Use “Modern Nanotechnology” Ural Federal University has been used.

1. Olivares J., García G., et al., Appl. Phys. Lett. 86, 183501 (2005).
2. Jubera M., Garcia-Cabañes A., et al., Appl. Phys. B, 116, 507 (2014).

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРОВ Tm^{2+} И Eu^{2+} В $SrCl_2$ И MeF_2 ($Me = Ca, Sr, Ba$): ПЕРВОПРИНЦИПНЫЙ РАСЧЕТ

Сердцев А.В.*, Чернышев В.А.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: saxara1994@yandex.ru

CRISTALLINE STRUCTURE OF Tm^{2+} AND Eu^{2+} IMPURITY CENTERS IN $SrCl_2$ AND MeF_2 ($ME = Ca, Sr, Ba$): FIRST-PRINCIPLES CALCULATIONS

Serdcey A.V.*, Chernyshev V.A.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The ab initio calculations of single impurity centers Tm^{2+} and Eu^{2+} in $SrCl_2$ and MeF_2 ($Me = Ca, Sr, Ba$) have been done. The crystal structure of single impurity centers was calculated.

Кристаллы со структурой флюорита $SrCl_2$ и MeF_2 ($Me = Ca, Sr, Ba$), активированные редкоземельными ионами R^{2+} , привлекают внимание исследователей как перспективные материалы для лазеров УФ диапазона [1]. В работе в рамках *ab initio* подхода исследована кристаллическая структура окружения точечных примесных центров Tm^{2+} и Eu^{2+} в $SrCl_2$ и MeF_2 , а также фоновый спектр активированных матриц.

Использовалась программа CRYSTAL09 [2], предназначенная для моделирования периодических структур в приближении МО ЛКАО. Проведенные расчеты показали, что использование гибридных функционалов B3LYP и PBE0 с оптимизацией базисных наборов позволяет воспроизвести кристаллическую структуру и ширину запрещенной щели кристаллических матриц достаточно хорошо – результаты совпадают с экспериментом в пределах погрешности.

Все методы качественно предсказывают одну и ту же картину искажений кристаллической решетки вблизи примесного иона R^{2+} . Максимально искажается первая координационная сфера (сжатие на ~ 0.02 Å (Tm^{2+}) и расширение на ~ 0.02 Å (Eu^{2+})), а смещения в следующих сферах не превышают 0.01 Å. Полученные результаты согласуются с данными ДЭЯР в пределах погрешности (Табл. 1).

Таблица 1. Радиальные координаты ионов (Å)
вблизи примесных центров $MeF_2: Tm^{2+}$ (PBE0 функционал).

Ион	CaF ₂		CaF ₂ :Tm ²⁺			SrF ₂		SrF ₂ :Tm ²⁺		
	S.M	PBE0	S.M.	ENDOR	PBE0	S.M.	PBE0	S.M.	ENDOR	PBE0
F(8)	2.358	2.370	2.385		2.413	2.503	2.509	2.443		2.493
Ca(12)	3.851	3.870	3.860		3.872	4.088	4.097	4.071		4.090
F(24)	4.516	4.538	4.520	4.524(6)	4.528	4.793	4.804	4.793	4.790(14)	4.801

S.M. – оболочечная модель

Информация об искажениях кристаллической решетки позволит в дальнейшем рассчитать электронную структуру примесного центра R²⁺ в рамках модели обменных зарядов [3], интерпретировать имеющиеся экспериментальные данные. Проведенные *ab initio* расчеты также позволят определить неэмпирические параметры межйонных взаимодействий для описания SrCl₂:R²⁺ в оболочечной модели, соответствующей кристаллам с ионным типом связи и не требующей значительных компьютерных ресурсов.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 3.571.2014/K)

1. Grimm J. et al., J. of Lumin., **126**, 2, 590 (2007).
2. Dovesi R, Saunders V R, Roetti C, et al, 2009 CRYSTAL09 User's Manual, University of Torino, Italy. URL: <http://www.crystal.unito.it>
3. Л.А. Бумагина, Б.Н. Казаков, Б.З. Малкин, А.Л. Столов, ФТТ, **19**, 1073 (1977).

ПОИСК ДЕФЕКТОВ ПРОТЯЖЕННЫХ АНОДНЫХ ЗАЗЕМЛИТЕЛЕЙ ПОДЗЕМНЫХ ТРУБОПРОВОДОВ БЕЗ ВСКРЫТИЯ

Кокорин А.В.^{*}, Назарова М.Н.

Национальный минерально-сырьевой университет «Горный»,
г. Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: alexkokorin.spmi@ya.ru

THE SEARCH FOR DEFECTS OF LONG GALVANIC ANODES FOR PIPELINES WITHOUT OPENING

Kokorin A.V.^{*}, Nazarova M.N.

Mining University, Saint-Petersburg, Russia

The article describes the problems with defects of long galvanic anodes and the performance loss of cathodic corrosion protection. The new instrumental complex is offered which allows to determine broken places of long galvanic anodes and coating. Working principle of the complex is based on the method of Pearson. Advantages and facilities of the complex over analogues are pointed out.